



TITLE:

4.W(100)再構成表面の計算機実験  
(大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度))

AUTHOR(S):

大辻, 清太

---

CITATION:

大辻, 清太. 4.W(100)再構成表面の計算機実験(大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度)). 物性研究 1989, 53(1): 132-132

ISSUE DATE:

1989-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93798>

RIGHT:

Fe-Ni-Cマルテンサイト中の $^{57}\text{Fe}$ 内部磁場分布から、炭素原子の影響は、純鉄中の $^{57}\text{Fe}$ 内部磁場の値に対し、主に小さい成分に2つ、大きい成分に1つ現れ、Fe-Cマルテンサイトの測定と類似した結果を与えた。さらに、 $^{13}\text{C}$ -NMR測定から、 $^{13}\text{C}$ 内部磁場分布には、1つのピークと3つのサテライトが存在することが明かとなり、それらは、格子間原子位置に侵入した炭素原子とNi原子に影響を受けた成分であると考えられる。

#### 4. W(100)再構成表面の計算機実験

大 辻 清 太

W(100)清浄表面は室温付近より低温で再構成を起こし、 $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造へと転移する。また、この再構成は、水素の吸着量によって変化する。吸着量が増加すると、(11)方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造から、(10)方向にWが変位する $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造、次いで、非整合相、STREEAK相、そして理想表面と同じ $1 \times 1$ 相へと変化する。

このW(100)水素吸着再構成表面系に対して、表面W原子の変位モデルと、吸着水素原子の格子ガスモデルを組合せたものに基づいて、現象論的なハミルトニアンを設定した。水素原子数についてのグランドカノニカルアンサンブルにおける計算機実験を行ない、 $\sqrt{2} \times \sqrt{2}R45^\circ$ 構造での、(11)相から(10)相になる転移について、温度と被覆度(水素の吸着量)による変化を詳しく調べた。

このとき、状態和において、吸着水素の自由度については先に和を取り、その結果得られる表面W原子の変位間の実効相互作用を、初めに仮定した相互作用に組入れた。また、転移点近傍の挙動を詳しく見る為に、Ferrenberg-Swendsenの方法<sup>1)</sup>を使って、化学ポテンシャルの変化についての被覆度の分布関数変化を計算した。

その結果、ある一点の化学ポテンシャルについての被覆度の分布関数をモンテカルロステップを増やして精密に求めれば、転移点近傍の化学ポテンシャルに対する、被覆度の分布関数の連続的な変化が得られることがわかった。その分布関数を使って、転移点付近の被覆度の変化や、そのサイズ依存性について解析した。

ある臨界温度以下では、(11)相と(10)相が共存する二相共存の領域がある。この領域の境界は、今までの方法では、計算の精度の問題やヒステリシスの為に、明確に決定することが困難であったが、これが可能になった。

この臨界温度より上では、(11)相から(10)相に連続的に変化する領域になる。この相方向変化の移り変わる点は、臨界点直上では明確に定める事が出来る。しかし高温では、計算に使った有限系の小ささの為に、小さなドメインが発生してしまい、定めることが出来なかった。

1) A.M.Ferrenberg,R.H.Swendsen Phys.Rev.Lett. 61 (1988) 2635